

Φαινόμενα Μεταφοράς

ΔΙΔΑΣΚΩΝ: ΣΟΥΦΛΑΣ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ

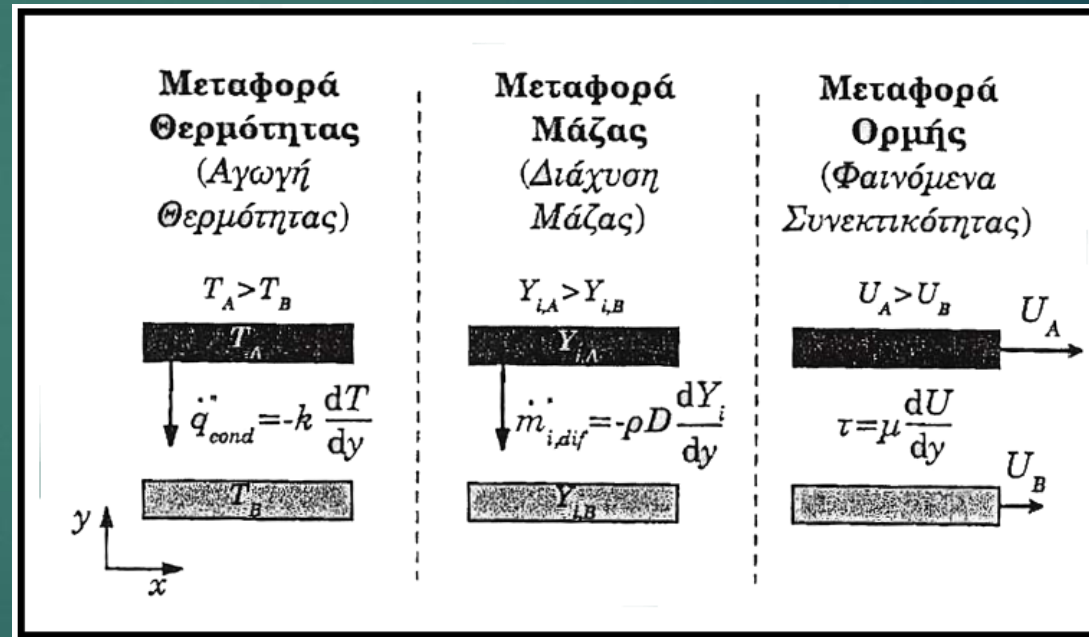


Φαινόμενα Μεταφοράς

Η **μοριακή μεταφορά ή διάχυση** είναι η διαδικασία κατά την οποία μια φυσική ιδιότητα μεταφέρεται από μια «πλεονάζουσα» θέση σε μια «ελλειπή» θέση, ως αποτέλεσμα μοριακών συγκρούσεων.

Παραδείγματα:

- Μεταφορά θερμότητας
- Μεταφορά μάζας
- Μεταφορά ορμής



Γενικές Παρατηρήσεις

- Η **Καύση** είναι μια διεργασία με **υψηλή ενέργεια ενεργοποίησης**.
- Συνεπώς, τα **πάχη της φλόγας** είναι πολύ μικρά ($<1\text{mm}$).
- Οι **διαβαθμίσεις (κλίσεις) ιδιοτήτων** (Property gradients) κατά μήκος της φλόγας είναι ιδιαίτερα **μεγάλες**.
- Οι μεγάλες διαβαθμίσεις οδηγούν σε **μεγάλους ρυθμούς διάχυσης**.
- Η **Διάχυση** έχει **υψίστη σημασία** στην καύση:
 - i. **Υπερβαίνει τη σημασία της συναγωγής** (convection) μέσα στη φλόγα.
 - ii. Είναι ο **κύριος μηχανισμός** για την ώθηση των **αντιδρώντων** (reactants) μέσα στη φλόγα.
 - iii. Είναι ο **κύριος μηχανισμός** για την απομάκρυνση των **προϊόντων** (products) από τη φλόγα.
 - iv. Είναι ο **κύριος μηχανισμός** για την απομάκρυνση της **θερμότητας** από τη φλόγα, και έτσι **θερμαίνονται** τα εισερχόμενα κρύα αντιδρώντα μέχρι τη **θερμοκρασία ανάφλεξης** τους.

Εισαγωγή στη Μεταφορά Μάζας



- Στο κέντρο ενός δωματίου αφήνεται ανοικτό ένα μπουκάλι κολόνια. Το άρωμα (μόρια κολόνιας) με αισθητήριο την οσμή γίνεται αντιληπτό σε μικρή απόσταση από το μπουκάλι. Λίγο αργότερα εντοπίζεται σε όλο το δωμάτιο.
- Οι διεργασίες μέσω των οποίων τα μόρια της κολόνιας μεταφέρονται από μια περιοχή υψηλής συγκέντρωσης κοντά στο μπουκάλι σε μια περιοχή χαμηλής συγκέντρωσης μακριά από αυτό αποτελούν αντικείμενο της Μεταφοράς Μάζας.
- Όμοια με τη Μετάδοση Θερμότητας και τη Μεταφορά Ορμής, η μάζα μπορεί να μεταφέρεται μέσω μοριακών διεργασιών (δηλ. μέσω συγκρούσεων μορίων) ή και μέσω διεργασιών τύρβης (έντονης ανάμειξης).
- Οι μοριακές διεργασίες είναι σχετικά αργές και αφορούν σε μικρές χωρικές κλίμακες ενώ οι διεργασίες τύρβης εξαρτώνται από την ταχύτητα και το μέγεθος των δινών (στροβίλων) που φέρει το μεταφερόμενο υλικό. Εδώ μελετάται μόνο η μοριακή μεταφορά.

Νόμος Διάχυσης του Fick.

- Θεωρείται μείγμα μη αντιδρώντων αερίων, αποτελούμενο από μοριακές ουσίες A, B. Ο νόμος του Fick περιγράφει το ρυθμό με τον οποίο το ένα συστατικό διαχέεται μέσω του δεύτερου. Προφανώς θεωρώντας περισσότερες των 2 ουσιών το θέμα γίνεται πιο πολύπλοκο.
- Στην απλή περίπτωση μονοδιάστατης δυαδικής διάχυσης ο ν.Fick διατυπώνεται:

$$\underbrace{\dot{m}_A''}_{\text{Παροχή μάζας της ουσίας A ανά μονάδα επιφανείας}} = \underbrace{Y_A \cdot (\dot{m}_A'' + \dot{m}_B'')}_{\text{Παροχή μάζας της ουσίας A ανά μονάδα επιφανείας λόγω της συνολικής κίνησης της ροής των αερίων}} - \underbrace{\rho \cdot \mathcal{D} \cdot \frac{dY_A}{dx}}_{\text{Παροχή μάζας της ουσίας A ανά μονάδα επιφανείας λόγω μοριακής διάχυσης}}$$

- όπου Y_A είναι το κλάσμα μάζας της ουσίας A.
- $\dot{m}_A''$: **ροή Μάζας** (mass flux) ορίζεται η παροχή μάζας του συστατικού A ανά μονάδα επιφάνειας κάθετα προς τη ροή των αερίων και έχει μονάδες $\text{kg/m}^2 - \text{s}$.
- Η έννοια της “ροής” είναι γνωστή από τη Μετάδοση Θερμότητας όπου ορίστηκε ως ροή θερμότητας.
- Ο **Ρυθμός Μετάδοσης Θερμότητας** ανά μονάδα επιφάνειας έχει μονάδες $\text{J/s} - \text{m}^2$.
- Ο **δυαδικός συντελεστής διάχυσης μάζας** (binary diffusivity coefficient) D_{AB} αποτελεί ιδιότητα του μείγματος και έχει μονάδες m^2/s . (Τιμές του D δίνονται στο Παράρτημα – Πίνακας D1).

$$\dot{m}_A'' = \frac{\dot{m}_A}{A}$$

$$\dot{Q}'' = \frac{\dot{Q}}{A}$$

Νόμος Διάχυσης του Fick.

$$\underbrace{\dot{m}_A''}_{\text{Παροχή μάζας της ουσίας A ανά μονάδα επιφανείας}} = \underbrace{Y_A \cdot (\dot{m}_A'' + \dot{m}_B'')}_{\text{Παροχή μάζας της ουσίας A ανά μονάδα επιφανείας λόγω της συνολικής κίνησης της ροής των αερίων}} - \underbrace{\rho \cdot \mathcal{D} \cdot \frac{dY_A}{dx}}_{\text{Παροχή μάζας της ουσίας A ανά μονάδα επιφανείας λόγω μοριακής διάχυσης}}$$

- Η εξίσωση περιγράφει τη μεταφορά μάζας της ουσίας A με 2 τρόπους:
- Ο 1^{ος} όρος στο δεξί μέλος δίνει τη μεταφορά του συστατικού A λόγω της συνολικής ροής του μείγματος ενώ,
- Ο 2^{ος} όρος δίνει τη διάχυση του συστατικού A που μπορεί να συμβαίνει επιπλέον της συνολικής ροής του μείγματος.
- Αν δεν θεωρηθεί διάχυση τότε η ροή μάζας του μείγματος σχετίζεται με τη ροή μάζας του συστατικού A με τη σχέση:

$$\dot{m}_A'' = Y_A \cdot (\dot{m}_A'' + \dot{m}_B'') = Y_A \dot{m}''$$

Νόμος Διάχυσης του Fick.

$$\underbrace{\dot{m}_A''}_{\text{Παροχή μάζας της ουσίας A ανά μονάδα επιφανείας}} = \underbrace{Y_A \cdot (\dot{m}_A'' + \dot{m}_B'')}_{\text{Παροχή μάζας της ουσίας A ανά μονάδα επιφανείας λόγω της συνολικής κίνησης της ροής των αερίων}} - \underbrace{\rho \cdot \mathcal{D} \cdot \frac{dY_A}{dx}}_{\text{Παροχή μάζας της ουσίας A ανά μονάδα επιφανείας λόγω μοριακής διάχυσης}}$$

$$\dot{m}_A'' = Y_A \cdot (\dot{m}_A'' + \dot{m}_B'') = Y_A \dot{m}''$$

$$-\rho \cdot \mathcal{D} \cdot \frac{dY_A}{dx} = \dot{m}_{A,diff}''$$

- Η ροή διάχυσης του συστατικού A είναι ανάλογη της βαθμίδας του κλάσματος μάζας με τη σταθερά αναλογίας να είναι η $-\rho \mathcal{D}_{AB}$.
- Προκύπτει έτσι ότι το συστατικό A τείνει να μεταφερθεί από μια περιοχή υψηλής συγκέντρωσης προς μια περιοχή χαμηλότερης συγκέντρωσης ακριβώς όπως η θερμότητα μεταφέρεται από μια περιοχή υψηλής θερμοκρασίας σε μια περιοχή χαμηλότερης θερμοκρασίας.
- Το αρνητικό πρόσημο καθιστά θετική ροή κατά τη διεύθυνση x όταν η βαθμίδα συγκέντρωσης είναι αρνητική.

Νόμος Διάχυσης του Fick.

$$\underbrace{\dot{m}_A''}_{\text{Παροχή μάζας της ουσίας A ανά μονάδα επιφανείας}} = \underbrace{Y_A \cdot (\dot{m}_A'' + \dot{m}_B'')}_{\text{Παροχή μάζας της ουσίας A ανά μονάδα επιφανείας λόγω της συνολικής κίνησης της ροής των αερίων}} - \underbrace{\rho \cdot \mathcal{D} \cdot \frac{dY_A}{dx}}_{\text{Παροχή μάζας της ουσίας A ανά μονάδα επιφανείας λόγω μοριακής διάχυσης}}$$

$$\dot{m}_A'' = Y_A \cdot (\dot{m}_A'' + \dot{m}_B'') = Y_A \dot{m}''$$

$$-\rho \cdot \mathcal{D} \cdot \frac{dY_A}{dx} = \dot{m}_{A,diff}''$$

$$\dot{Q}_x'' = -k \frac{dT}{dx}$$

- Προκύπτει δηλ. αναλογία μεταξύ της διάχυσης μάζας και της διάχυσης θερμότητας, δηλ. αναλογία μεταξύ ν.Fourier και N.Fick.
- Οι δύο εκφράσεις δείχνουν μια αναλογία μεταξύ ροής μάζας και ροής θερμότητας με τη βαθμίδα ενός βαθμωτού μεγέθους (συγκέντρωσης και θερμοκρασίας αντίστοιχα), ενώ συμμετέχουν και οι σταθερές αναλογίας.

Διάχυση Μάζας (Mass Diffusion)

Ο μοναδιαίος ρυθμός μεταφοράς μάζας (λόγω διάχυσης) υπολογίζεται με τη χρήση του 1^{ου} **νόμου του Fick**.

$$\dot{m}''_{A,diff} = -\rho D_{AB} \frac{dY_A}{dx}$$

Ο νόμος του Fick χρησιμοποιείται γενικότερα για τον υπολογισμό του διανυσματικού μεγέθους της διάχυσης μάζας.

$$\vec{\dot{m}}''_{A,diff} = -\rho D_{AB} \left(\frac{\partial Y_A}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial Y_A}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial Y_A}{\partial z} \hat{k} \right) = -\rho D_{AB} \nabla Y_A$$

Ο μοναδιαίος ρυθμός μεταφοράς θερμότητας μέσω αγωγής ανά μονάδα επιφάνειας (ροή θερμότητας) υπολογίζεται με τη χρήση του φαινομενολογικού **νόμου του Fourier**

$$\dot{q}''_{cond} = -k \frac{dT}{dx}$$

Ο νόμος του Fourier χρησιμοποιείται γενικότερα για τον υπολογισμό του διανυσματικού μεγέθους της ροής θερμότητας λόγω αγωγής

$$\vec{\dot{q}}''_{cond} = -k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial T}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial T}{\partial z} \hat{k} \right) = -k \nabla T$$

Διάχυση Δευτέρας Τάξεως (Second Order diffusion)

Η παραπάνω συζήτηση αφορούσε τη θερμική διάχυση παρουσία θερμοκρασιακής διαβάθμισης και τη μαζική διάχυση παρουσία διαβάθμισης συγκέντρωσης.

Μπορεί να υπάρξει θερμική διάχυση παρουσία διαβάθμισης συγκέντρωσης, ενώ μπορεί να υπάρξει και μαζική διάχυση παρουσία θερμοκρασιακής διαβάθμισης.

Αυτές οι δευτερεύουσες διεργασίες είναι γνωστές, αντιστοίχως, ως **φαινόμενο Dufour** και **φαινόμενο Soret**.

Φαινόμενο Soret (Soret Effect)

- Διάχυση μάζας που προκαλείται **από θερμοκρασιακή διαβάθμιση**.
- Δηλαδή, ακόμα κι αν δεν υπάρχει διαβάθμιση συγκέντρωσης, μια διαφορά θερμοκρασίας μπορεί να προκαλέσει μετακίνηση συστατικών σε ένα μείγμα.

Φαινόμενο Dufour (Dufour Effect)

- Θερμική διάχυση (ροή θερμότητας) που προκαλείται **από συγκεντρωσιακή διαβάθμιση**.
- Ακόμα και αν δεν υπάρχει θερμοκρασιακή διαφορά, μια διαφορά στη συγκέντρωση δύο συστατικών μπορεί να προκαλέσει ροή θερμότητας.

Αδιάστατοι αριθμοί

Σχετιζόμενη με κάθε φαινόμενο διάχυσης είναι η χαρακτηριστική ταχύτητα εξάπλωσης, η οποία έχει διάσταση μήκους²/δευτερόλεπτο.

Για τη διάχυση μάζας αυτό είναι απλώς το D_{AB} .

Για την εξάπλωση του ιξώδους το σχετικό μέγεθος είναι το κινηματικό ιξώδες:

$$\nu = \frac{\mu}{\rho}$$

ενώ για τη θερμική αγωγιμότητα έχουμε τις θερμικές διαχυστικότητες:

$$\alpha = \frac{k}{\rho c_p}$$

όπου c_p είναι η κατάλληλη ειδική θερμότητα που πρέπει να χρησιμοποιηθεί.

Αδιάστατοι αριθμοί

Λαμβάνοντας τους λόγους αυτών των χαρακτηριστικών ρυθμών εξάπλωσης, μπορούμε να ορίσουμε έναν αριθμό Schmidt:

$$Sc = \frac{\nu}{D_{AB}}$$

που αποτελεί μέτρο της σχετικής επιρροής του ιξώδους ως προς τη διάχυση μάζας,

έναν αριθμό Prandtl:

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\mu c_p}{k}$$

που αποτελεί μέτρο της σχετικής επιρροής του ιξώδους ως προς τη θερμική διάχυση,

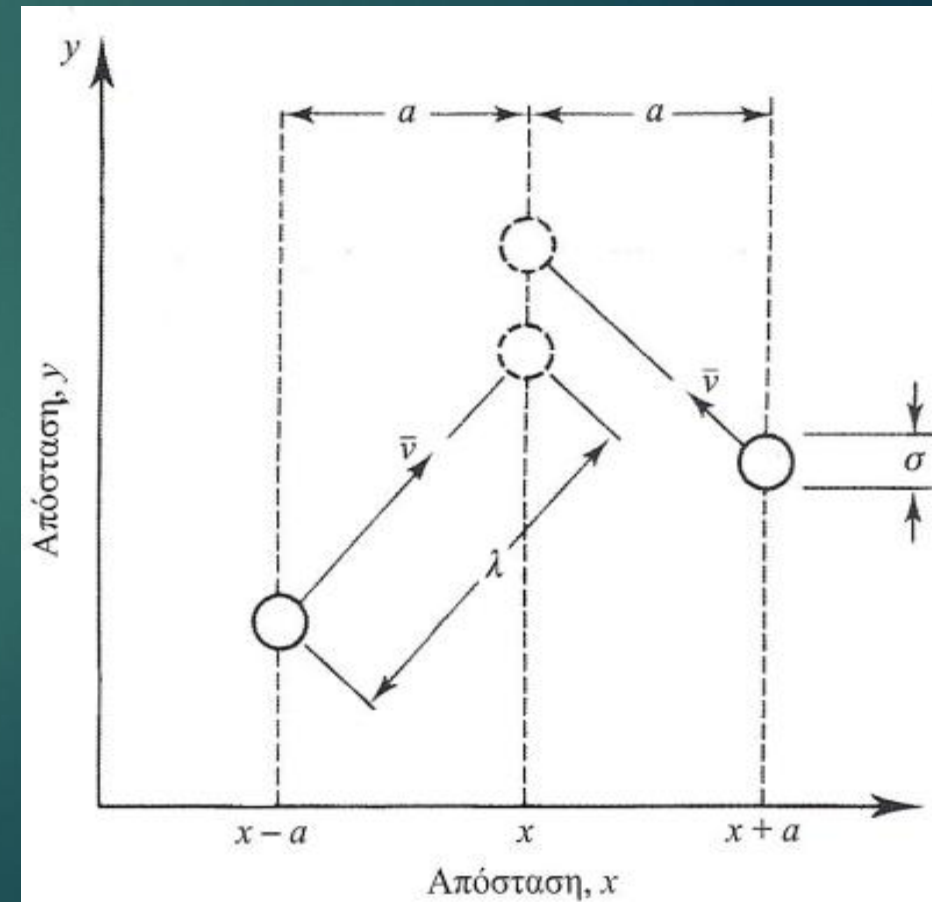
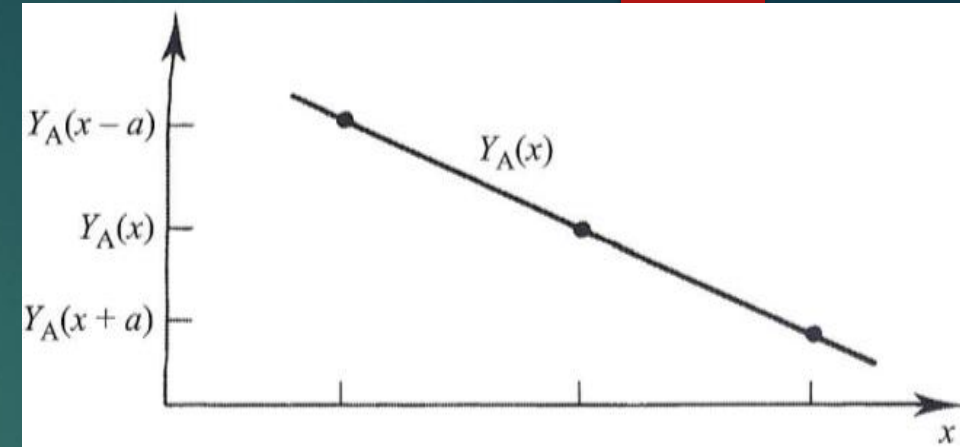
και έναν αριθμό Lewis:

$$Le = \frac{a}{D_{AB}} = \frac{Sc}{Pr} = \frac{k}{c_p \rho D_{AB}}$$

που αποτελεί μέτρο της σχετικής επιρροής της διάχυσης θερμότητας ως προς τη διάχυση μάζας.

Η μοριακή βάση της Διάχυσης

- Για να αποκτήσουμε μια καλύτερη εικόνα των μοριακών διεργασιών που οδηγούν στους μακροσκοπικούς νόμους της διάχυσης μάζας (νόμος του Fick) (και της διάχυσης ή αγωγής θερμότητας, νόμος του Fourier), χρησιμοποιούμε ορισμένες έννοιες από την κινητική θεωρία των αερίων.
- Ας θεωρήσουμε ένα ακίνητο (χωρίς ροή μάζας) επίπεδο στρώμα ενός δυαδικού μείγματος αερίων που αποτελείται από άκαμπτα, μη ελκτικά μόρια, στα οποία η μοριακή μάζα κάθε συστατικού A και B είναι ουσιαστικά ίση.
- Στο στρώμα αερίου υπάρχει μια βαθμίδα συγκέντρωσης (κλάσματος μάζας) κατά τη διεύθυνση x , η οποία είναι αρκετά μικρή ώστε η κατανομή του κλάσματος μάζας να μπορεί να θεωρηθεί γραμμική σε μια απόσταση μερικών μέσων ελεύθερων διαδρομών, λ .



Η μοριακή βάση της Διάχυσης

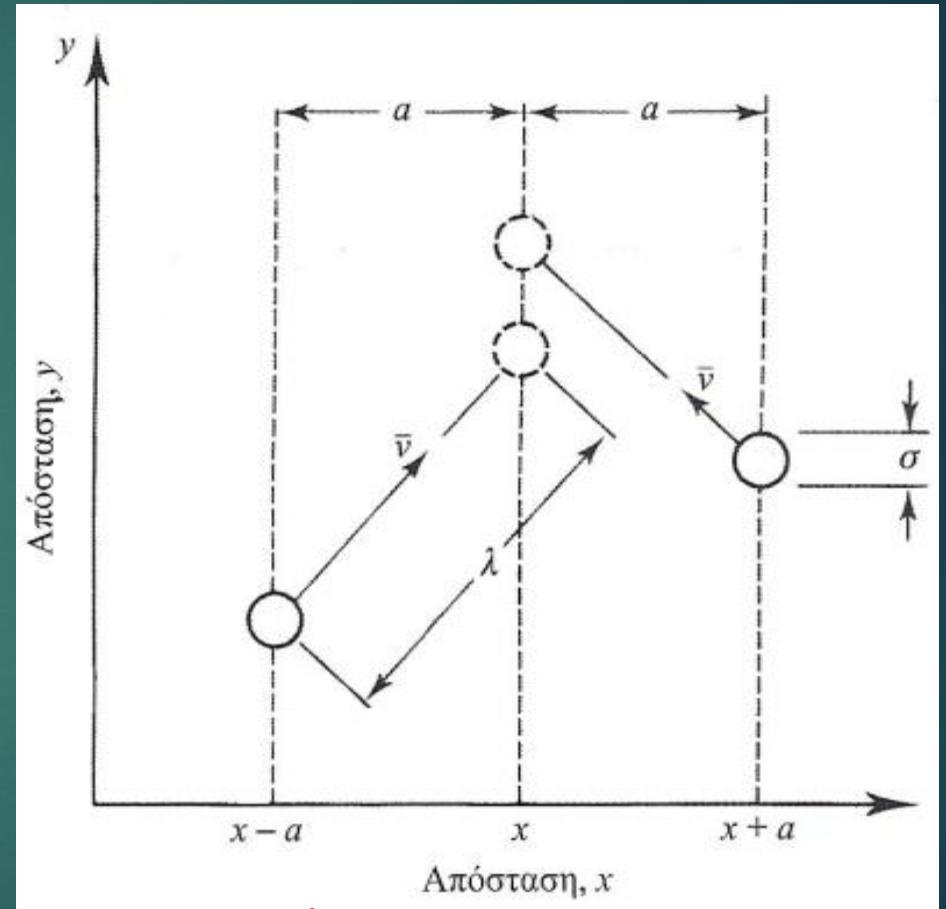
- Υπό τις παραπάνω παραδοχές ορίζονται σύμφωνα με την Κινητική Θεωρία κάποιες **μέσες μοριακές ιδιότητες** όπως:

$$\bar{v} \equiv \text{Mean speed of species A molecules} = \left(\frac{8k_B T}{\pi m_A} \right)^{1/2},$$

$$Z_A'' \equiv \text{The number of molecules of species A crossing a plane per unit area per unit time} = \frac{1}{4} \left(\frac{n_A}{V} \right) \bar{v},$$

$$\lambda \equiv \text{Mean free path} = \frac{1}{\sqrt{2} \pi \left(\frac{n_{\text{tot}}}{V} \right) \sigma^2},$$

$$a \equiv \text{Average perpendicular distance from plane of last collision to plane where next collision occurs} = \frac{2}{3} \lambda,$$



~~$Z_A'' \equiv \text{Wall collision frequency of A molecules per unit area}$~~

Η μοριακή βάση της Διάχυσης

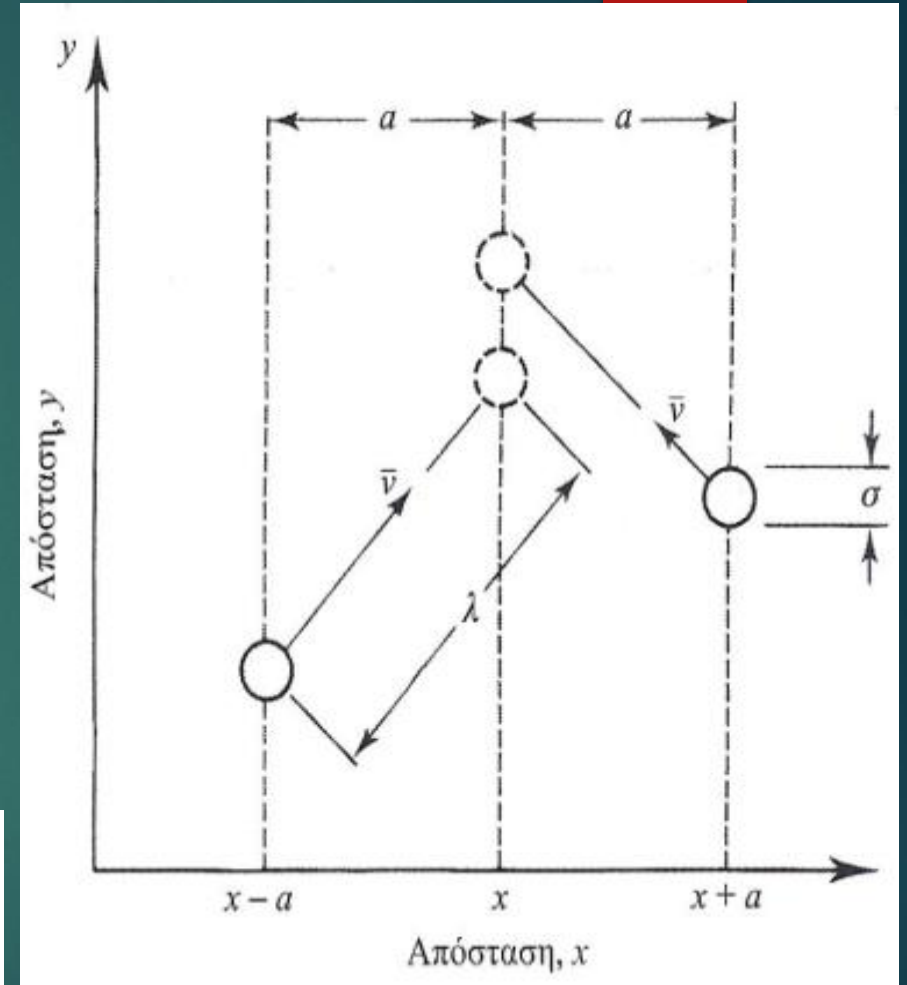
- Θεωρούμε ότι δεν υπάρχει μια συνολική ροή του μείγματος (bulk flow), οπότε η καθαρή ροή των μορίων A στο επίπεδο x θα είναι η διαφορά μεταξύ της ροής των μορίων του A κατά τη θετική διεύθυνση στον άξονα x, μείον τη ροή των μορίων του A στην αρνητική διεύθυνση του άξονα x.

$$\dot{m}''_A = \dot{m}''_{A, (+)x\text{-dir}} - \dot{m}''_{A, (-)x\text{-dir}}$$

Η σχέση μπορεί να γραφεί:

$$\dot{m}''_A = (Z''_A)_{x-a} m_A - (Z''_A)_{x+a} m_A$$

$\left(\begin{array}{c} \text{Net mass} \\ \text{flux of} \\ \text{species A} \end{array} \right)$	$\left(\begin{array}{c} \text{Number of A} \\ \text{molecules crossing} \\ \text{plane at } x \text{ originating} \\ \text{from plane at } x-a \\ \text{per unit time and area} \end{array} \right)$	$\left(\begin{array}{c} \text{Mass of} \\ \text{single} \\ \text{molecule} \end{array} \right)$	$\left(\begin{array}{c} \text{Number of A} \\ \text{molecules crossing} \\ \text{plane at } x \text{ originating} \\ \text{from plane at } x+a \\ \text{per unit time and area} \end{array} \right)$	$\left(\begin{array}{c} \text{Mass of} \\ \text{single} \\ \text{molecule} \end{array} \right)$
---	---	--	---	--



Η μοριακή βάση της Διάχυσης

$$\dot{m}_A'' = (Z_A'')_{x-a} m_A - (Z_A'')_{x+a} m_A$$

- Συμπεριλαμβάνοντας την πυκνότητα ($\rho = m_{tot}/V$) μπορεί να γραφτεί:

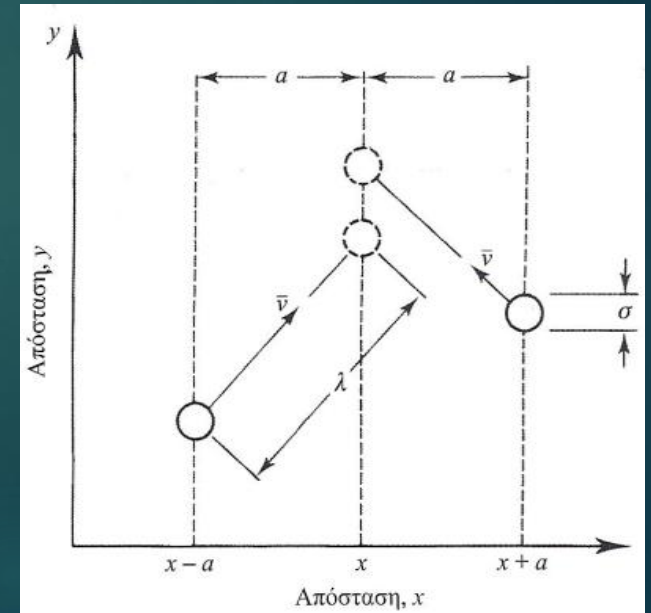
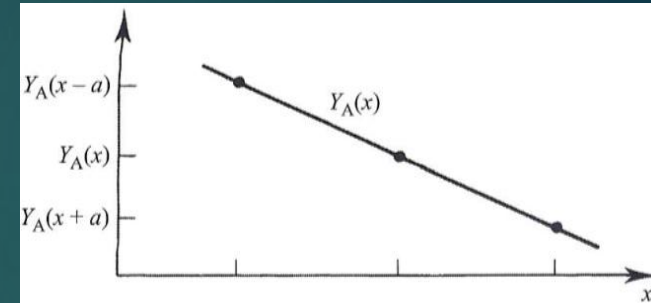
$$\left. \begin{aligned} Z_A'' m_A &= \left(\frac{1}{4} \frac{n_A}{V} \bar{v} \right) m_A \\ \rho &= \frac{m_{tot}}{V} \Rightarrow V = \frac{m_{tot}}{\rho} \end{aligned} \right\} \Rightarrow Z_A'' m_A = \frac{1}{4} \left(n_A \frac{m_A}{m_{tot}} \right) \rho \bar{v} \Rightarrow Z_A'' m_A = \frac{1}{4} Y_A \rho \bar{v}$$

$$\dot{m}_A'' = \frac{1}{4} \rho \bar{v} (Y_{A,x-a} - Y_{A,x+a})$$

- Υπό την παραδοχή της γραμμικής κατανομής της συγκέντρωσης θα είναι:

$$\frac{dY_A}{dx} = \frac{Y_{A,x+a} - Y_{A,x-a}}{2a} = \frac{Y_{A,x+a} - Y_{A,x-a}}{4\lambda/3}$$

$$a = \frac{2}{3} \lambda$$



Η μοριακή βάση της Διάχυσης

$$\dot{m}''_A = \frac{1}{4} \rho \bar{v} (Y_{A,x-a} - Y_{A,x+a})$$

$$\frac{dY_A}{dx} = \frac{Y_{A,x+a} - Y_{A,x-a}}{2a} = \frac{Y_{A,x+a} - Y_{A,x-a}}{4\lambda/3}$$

$$Y_{A,x+a} - Y_{A,x-a} = \frac{4\lambda}{3} \frac{dY_A}{dx}$$

$$\dot{m}''_A = -\frac{1}{\cancel{4}} \rho \bar{v} \left(\frac{\cancel{4}\lambda}{3} \frac{dY_A}{dx} \right) \Rightarrow \dot{m}''_A = -\rho \frac{\lambda \bar{v}}{3} \frac{dY_A}{dx}$$

$$-\rho \cdot \mathcal{D} \cdot \frac{dY_A}{dx} = \dot{m}''_{A,diff}$$

$$D = \frac{\bar{v}\lambda}{3}$$

Η μοριακή βάση της Διάχυσης

- Συμπεριλαμβάνοντας τις εκφράσεις της μέσης ταχύτητας των μορίων της ουσίας Α καθώς και της μέσης ελεύθερης διαδρομής, ο συντελεστής δυαδικής διάχυσης μπορεί να πάρει τη μορφή:

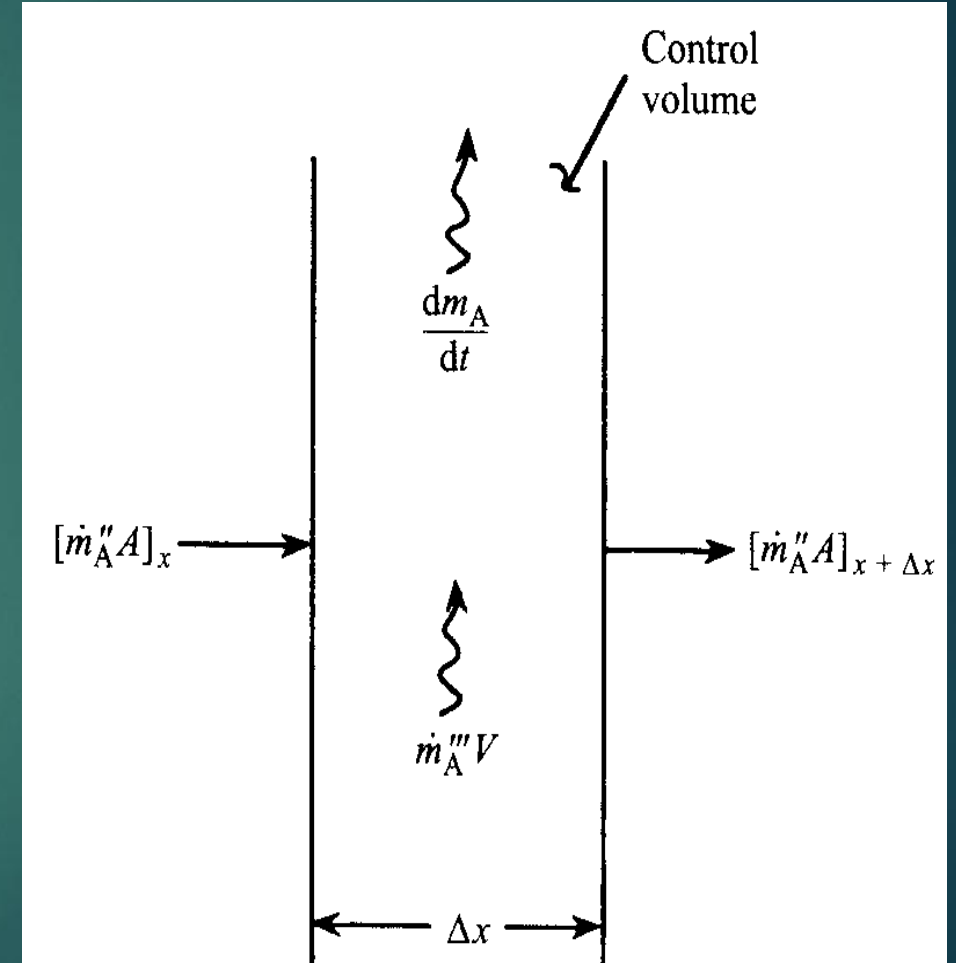
$$\begin{aligned} D &= \frac{\bar{v}\lambda}{3} \quad \begin{matrix} \bar{v} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_A}} \\ \lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \cdot \pi \frac{n_{tot}}{V} \sigma^2} \end{matrix} \Rightarrow D = \frac{1}{3} \left(\sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_A}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2} \cdot \pi \frac{n_{tot}}{V} \sigma^2} \right) \Rightarrow \\ D &= \frac{1}{3} \left(\sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_A}} \right) \left(\frac{V}{\sqrt{2} \cdot \pi \cdot n_{tot} \cdot \sigma^2} \right) \stackrel{PV=n_{tot}k_B T}{\Rightarrow} D = \frac{1}{3} \left(\sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_A}} \right) \left(\frac{\cancel{n_{tot}} k_B T}{\sqrt{2} \cdot \pi \cdot \cancel{n_{tot}} \cdot \sigma^2} \right) \frac{1}{P} \\ \Rightarrow D &= \frac{2}{3} \sqrt{\frac{k_B^3 T}{\pi^3 m_A}} \frac{T}{\sigma^2 P} \Rightarrow \boxed{D \propto T^{3/2} P^{-1}} \end{aligned}$$

Έτσι, βλέπουμε ότι η διαχυτότητα είναι ανάλογη της θερμοκρασίας (στην 3/2 δύναμη) και μεταβάλλεται αντιστρόφως ανάλογα με την πίεση.

$$\rho \mathcal{D}_{AB} \propto T^{1/2} P^0 = T^{1/2}$$

Η διατήρηση των Συστατικών

- Στο σημείο αυτό χρησιμοποιείται ο νόμος του ρυθμού μεταφοράς μάζας (ν.Fick) για την κατάστρωση μιας βασικής έκφρασης για τη διατήρηση της μάζας.
- Θεωρείται όγκος ελέγχου (μονοδιάστατος) που είναι μια επίπεδη διεπιφάνεια πάχους Δx και επιφάνειας A .
- Από τα όρια του όγκου αυτού μπορεί να εισέρχεται και να εξέρχεται συστατικό A λόγω της συνδυασμένης δράσης της συνολικής ροής και της διάχυσης, ενώ εντός του όγκου ελέγχου το συστατικό A μπορεί να καταστρέφεται ή να δημιουργείται ως αποτέλεσμα χημικών αντιδράσεων.



Η διατήρηση των Συστατικών

➤ Ο καθαρός (net) ρυθμός αύξησης της μάζας του συστατικού A εντός του όγκου ελέγχου μπορεί να επαναδιατυπωθεί ως:

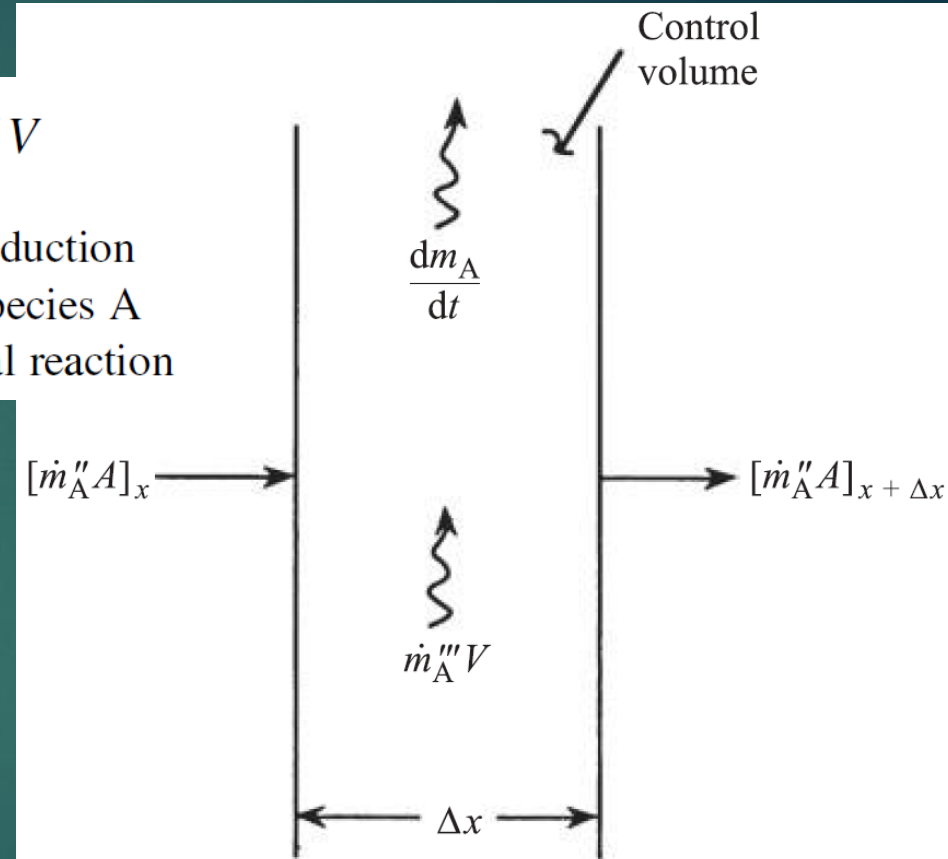
$$\frac{dm_{A,cv}}{dt} = [\dot{m}''_A]_x - [\dot{m}''_A]_{x+\Delta x} + \dot{m}'''_A V$$

Rate of increase of mass of A within control volume	Mass flow of A into the control volume	Mass flow of A out of the control volume	Mass production rate of species A by chemical reaction
---	--	--	--

$$m_{A,cv} = Y_A m_{cv} = Y_A \rho V_{cv}$$

$$V_{cv} = A \Delta x$$

$\dot{m}'''_A$ είναι ο ρυθμός παραγωγής (ή κατανάλωσης) μάζας του είδους A ανά μονάδα όγκου ($kg_A/m^3 - s$)



$$\sum_{i=1}^N \nu_i' M_i \Rightarrow \sum_{i=1}^N \nu_i'' M_i \quad \frac{\hat{\omega}_i}{\nu_i'' - \nu_i'} = \frac{\hat{\omega}_j}{\nu_j'' - \nu_j'} \equiv \omega \quad \hat{\omega}_i = \frac{dc_i}{dt} \quad \omega = k_f \prod_{i=1}^N c_i^{\nu_i'}$$

$$c_i \text{ (mol/m}^3\text{)}$$

$$\omega \text{ (mol/m}^3 - s\text{)}$$

$$\dot{m}'''_A = \hat{\omega} MW_A \left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^3 - s} \frac{\text{kg}}{\text{mol}} \right]$$

Η διατήρηση των Συστατικών

$$\frac{dm_{A,cv}}{dt} = [\dot{m}_A'' A]_x - [\dot{m}_A'' A]_{x+\Delta x} + \dot{m}_A''' V$$

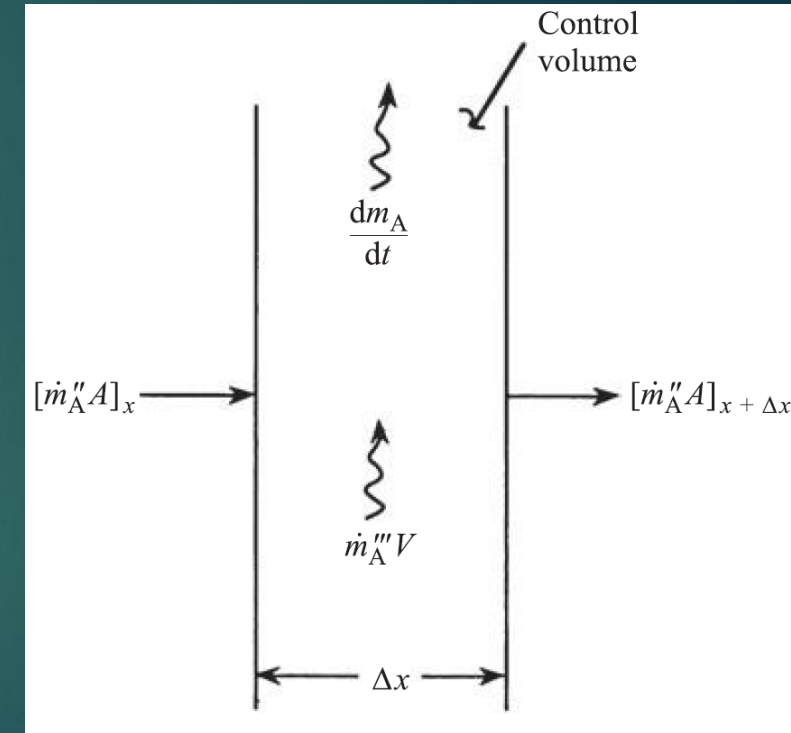
$$m_{A,cv} = Y_A m_{cv} = Y_A \rho V_{cv}$$

$$V_{cv} = A \Delta x$$

$$A \Delta x \frac{\partial(\rho Y_A)}{\partial t} = A \left[Y_A \dot{m}'' - \rho \mathcal{D}_{AB} \frac{\partial Y_A}{\partial x} \right]_x - A \left[Y_A \dot{m}'' - \rho \mathcal{D}_{AB} \frac{\partial Y_A}{\partial x} \right]_{x+\Delta x} + \dot{m}_A''' A \Delta x$$

➤ Διαιρώντας με $(A \Delta x)$ για $\Delta x \rightarrow 0$ τότε η σχέση ανάγεται σε:

$$\frac{\partial(\rho Y_A)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \left[Y_A \dot{m}'' - \rho \mathcal{D}_{AB} \frac{\partial Y_A}{\partial x} \right] + \dot{m}_A'''$$



$$\dot{m}_A'' = Y_A (\dot{m}_A'' + \dot{m}_B'') - \rho \mathcal{D}_{AB} \frac{dY_A}{dx}$$

Η διατήρηση των Συστατικών

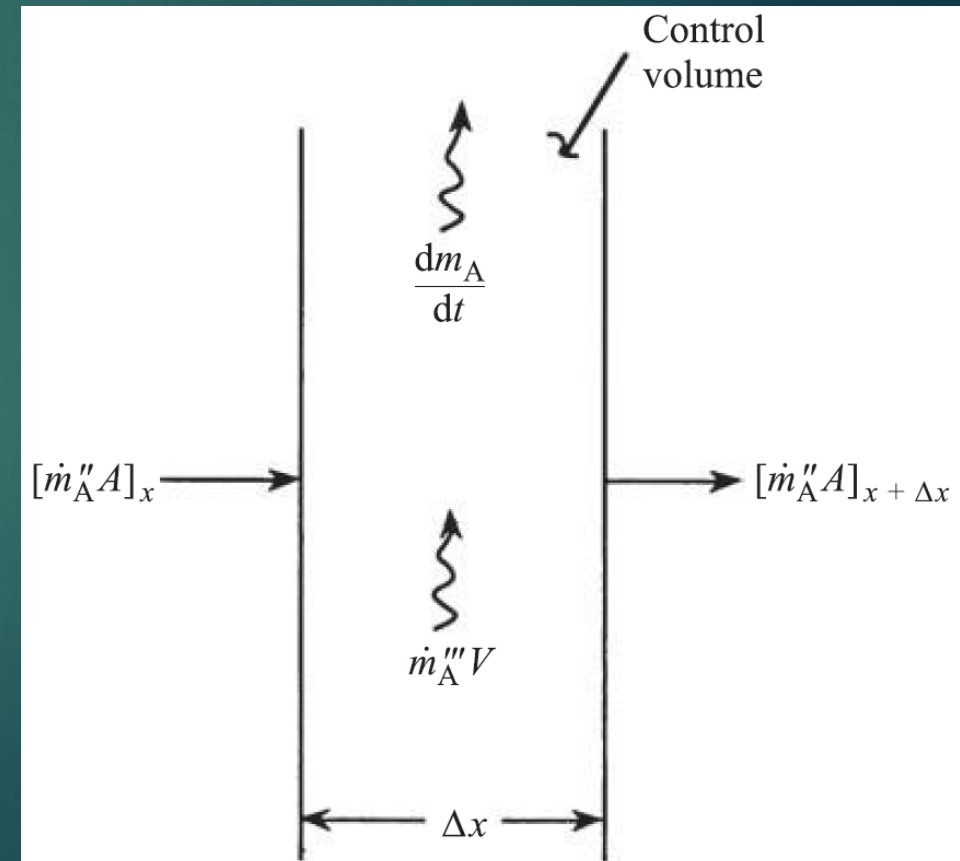
$$\frac{\partial(\rho Y_A)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[Y_A \dot{m}'' - \rho \mathcal{D}_{AB} \frac{\partial Y_A}{\partial x} \right] + \dot{m}_A'''$$

Για μόνιμη ροή: $\partial(\rho Y_A)/\partial t = 0$

$$\dot{m}_A''' - \frac{d}{dx} \left[Y_A \dot{m}'' - \rho \mathcal{D}_{AB} \frac{dY_A}{dx} \right] = 0$$

➤ Η τελευταία εξίσωση αποτελεί τη **διατύπωση της διατήρησης των συστατικών ενός δυαδικού αερίου μείγματος υπό συνθήκες μόνιμης μονοδιάστατης ροής** θεωρώντας ότι η διάχυση των συστατικών συμβαίνει μόνο λόγω των βαθμίδων συγκέντρωσης. Στην περίπτωση πολυδιάστατης ροής η γενικευμένη σχέση γράφεται:

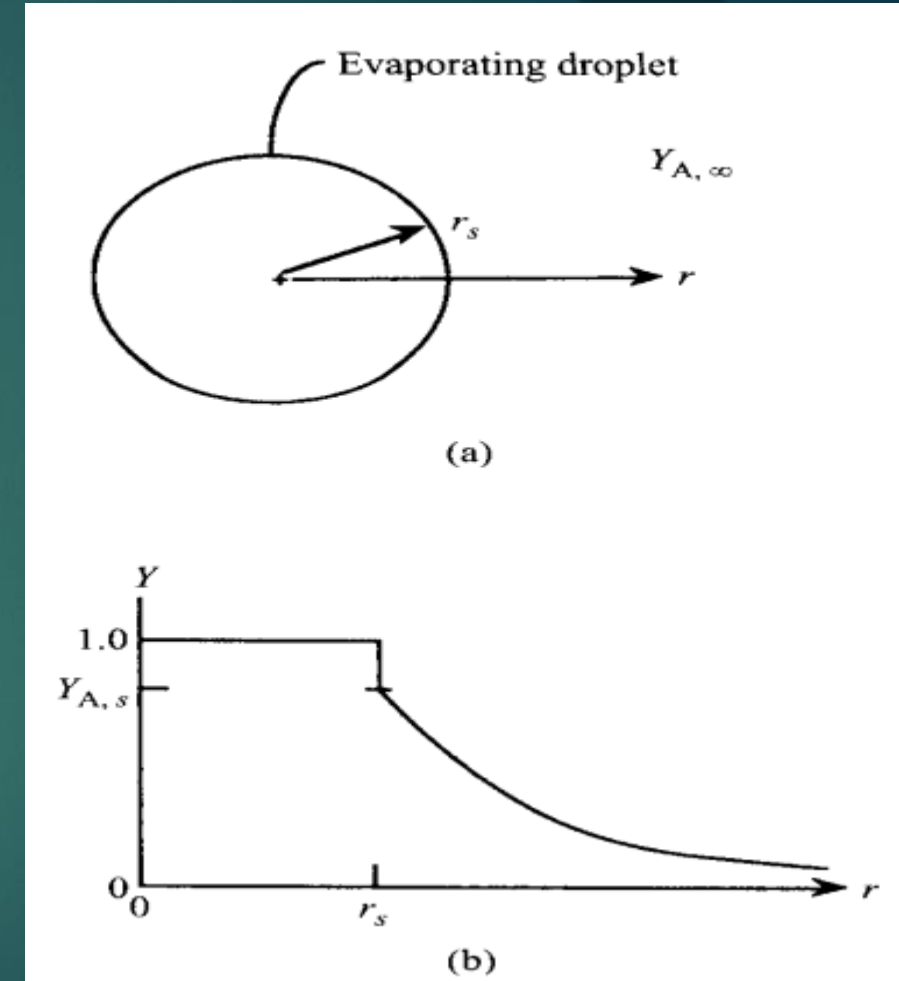
$\dot{m}_A'''$	-	$\nabla \cdot \dot{m}_A''$	= 0
Net rate of production of species A by chemical reaction, per unit volume		Net flow of species A out of control volume, per unit volume	



Εξάτμιση Σταγόνas

Εφαρμογές Μεταφοράς Μάζας – Εξάτμιση Σταγόνας.

- Η μελέτη της εξάτμισης σταγόνας είναι ενδεικτική της εφαρμογής των εννοιών της μεταφοράς μάζας σε αμιγώς τεχνικά προβλήματα.
- Ορίζεται συμμετρικό σύστημα σφαιρικών συντεταγμένων με μοναδική μεταβλητή την ακτίνα r . Αρχή του συστήματος είναι το κέντρο της σταγόνας και η ακτίνα της σταγόνας επί της διεπιφάνειας υγρού – ατμού σημειώνεται ως r_s .
- Σε «άπειρη» απόσταση από την επιφάνεια της σταγόνας ($r \rightarrow \infty$) το κλάσμα μάζας των ατμών της σταγόνας είναι $Y_{A,\infty}$.



Εφαρμογές Μεταφοράς Μάζας – Εξάτμιση Σταγόνας.

- Η ενέργεια που απαιτείται για την εξάτμιση του υγρού προσφέρεται από το περιβάλλον και ο ατμός στη συνέχεια διαχέεται από την επιφάνεια της σταγόνας προς το περιβάλλον αέριο.
- Η εξατμιζόμενη μάζα οδηγεί σε συρρίκνωση της σταγόνας μέχρι αυτή να ατμοποιηθεί εξ' ολοκλήρου ($r_s = 0$).

Το πρόβλημα

- Ο προσδιορισμός της παροχής μάζας των ατμών από την επιφάνεια της σταγόνας ως συνάρτηση του χρόνου.
- Ο υπολογισμός της ακτίνας της σταγόνας συναρτήσει του χρόνου καθώς και ο συνολικός χρόνος πλήρους εξάτμισης της σταγόνας.

Εφαρμογές Μεταφοράς Μάζας – Εξάτμιση Σταγόνας.

Για την πλήρη μαθηματική περιγραφή της διεργασίας αυτής, απαιτείται η εφαρμογή μιας σειράς ισοζυγίων όπως:

➤ Για τη σταγόνα:

- εφαρμογή ισοζυγίου μάζας
- εφαρμογή ισοζυγίου ενέργειας,

➤ Για το μείγμα ατμών σταγόνας και περιβάλλοντος αερίου ($r_s < r < \infty$):

- εφαρμογή διατήρησης μάζας,
- εφαρμογή διατήρησης συστατικών της σταγόνας
- εφαρμογή διατήρησης ενέργειας.

➤ Δηλ. πρέπει να κατασκευαστούν **τουλάχιστον 5 εξισώσεις** οι οποίες γενικά είναι συνήθεις ή μερικές Δ.Ε ανάλογα με τις παραδοχές απλοποίησης του προβλήματος που θα υιοθετηθούν κατά περίπτωση

Εξάτμιση Σταγόνας

➤ ΠΑΡΑΔΟΧΕΣ

1. Η διεργασία της εξάτμισης μπορεί να περιγραφεί ως μόνιμη (*steady state*).
2. Η θερμοκρασία της σταγόνας είναι προκαθορισμένη ομοιόμορφη και σταθερή (χαμηλότερη από το σημείο βρασμού).

Η παραδοχή μιας συγκεκριμένης θερμοκρασίας εξαλείφει την ανάγκη εφαρμογής της διατήρησης της ενέργειας τόσο εντός της σταγόνας όσο και στην αέρια φάση που περιβάλλει τη σταγόνα.

3. Το κλάσμα μάζας των ατμών στην επιφάνεια της σταγόνας $Y_{A,s}$ προσδιορίζεται από την ισορροπία φάσεων υγρού (σταγόνα) και αερίου (περιβάλλον σταγόνας), στη θερμοκρασία της σταγόνας.
4. Όλες οι θερμοφυσικές ιδιότητες και κυρίως το γινόμενο ρD_{AB} είναι σταθερό.

Εξάτμιση Σταγόνας

➤ Τα μόρια που αποτελούν αρχικά την υγρή φάση είναι και εκείνα που μεταφέρονται.

➤ Η έκφραση **διατήρησης μάζας στην επιφάνεια** της σταγόνας:

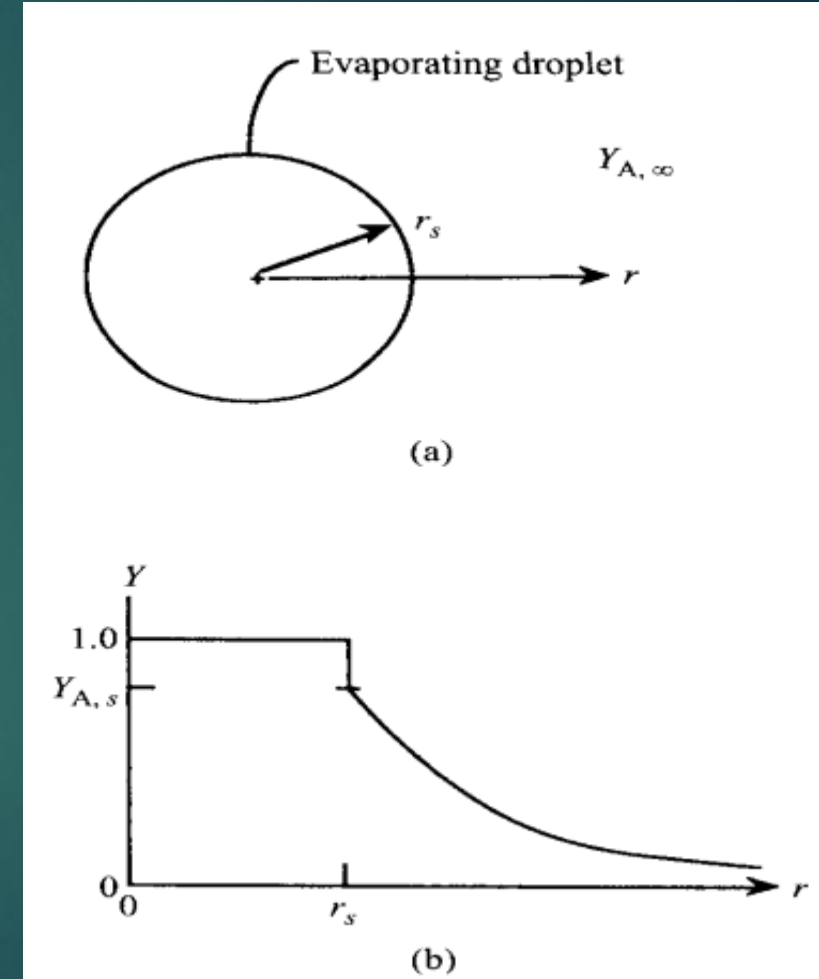
$$\dot{m}(r) = \text{constant} = 4\pi r^2 \dot{m}''$$

$$\dot{m}'' = \dot{m}''_A + \dot{m}''_B = \dot{m}''_A, \quad \dot{m}''_B = 0$$

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι η παροχή μάζας παραμένει σταθερή αλλά όχι και η ροή μάζας.

➤ Η έκφραση **διατήρησης των συστατικών** για τους ατμούς της σταγόνας:

$$\dot{m}''_A = Y_A \dot{m}'' - \rho \mathcal{D}_{AB} \frac{dY_A}{dr}$$



Εξάτμιση Σταγόνας

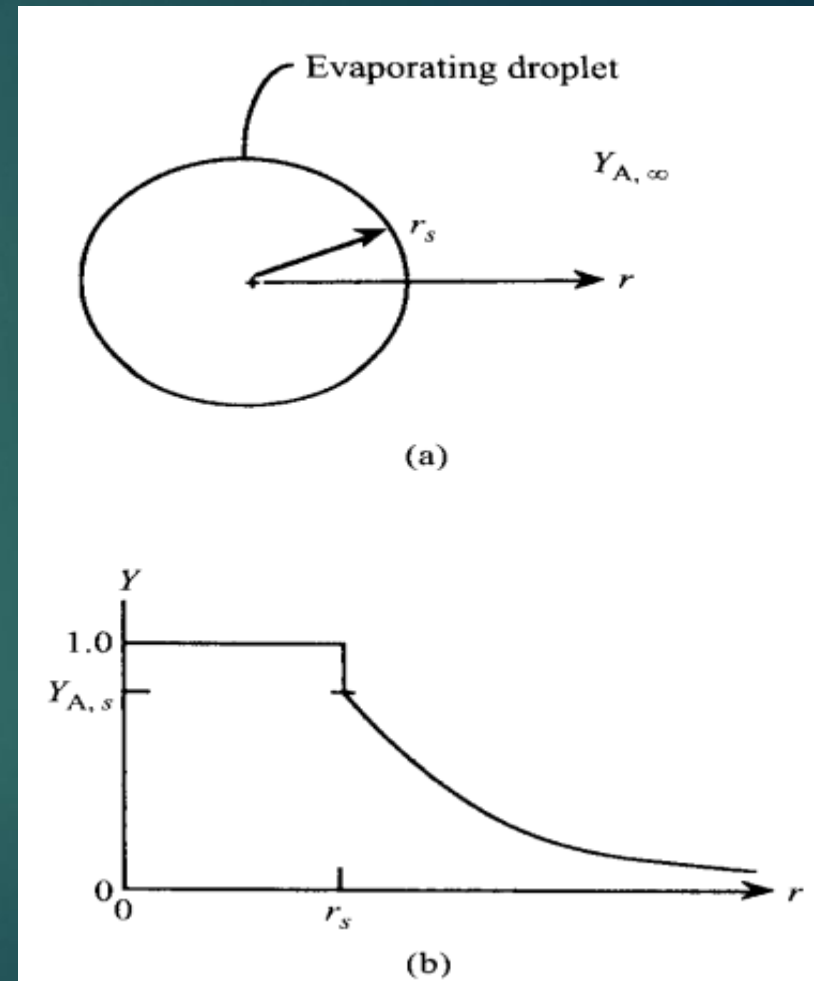
- Αντικαθιστώντας της εξ. διατήρησης μάζας στην εξ. διατήρησης των συστατικών:

$$\dot{m} = -4\pi r^2 \frac{\rho \mathcal{D}_{AB}}{1 - Y_A} \frac{dY_A}{dr}$$

- Ολοκληρώνοντας από την επιφάνεια της σταγόνας όπου: $r = r_s$, $Y_A = Y_{A,s}$ έως μια απόσταση r όπου $Y_A = Y_A(r)$ έχουμε:

$$Y_A(r) = 1 - \frac{(1 - Y_{A,s}) \exp[-\dot{m}/(4\pi\rho\mathcal{D}_{AB}r)]}{\exp[-\dot{m}/(4\pi\rho\mathcal{D}_{AB}r_s)]}$$

είναι η κατανομή του κλάσματος μάζας του Α στο αέριο, γύρω από ένα εξατμιζόμενο σταγονίδιο.



$$\dot{m}_A'' = Y_A \dot{m}_A'' - \rho \mathcal{D}_{AB} \frac{dY_A}{dr}$$

Εξάτμιση Σταγόνας

$$Y_A(r) = 1 - \frac{(1 - Y_{A,s}) \exp[-\dot{m}/(4\pi\rho\mathcal{D}_{AB}r)]}{\exp[-\dot{m}/(4\pi\rho\mathcal{D}_{AB}r_s)]}$$

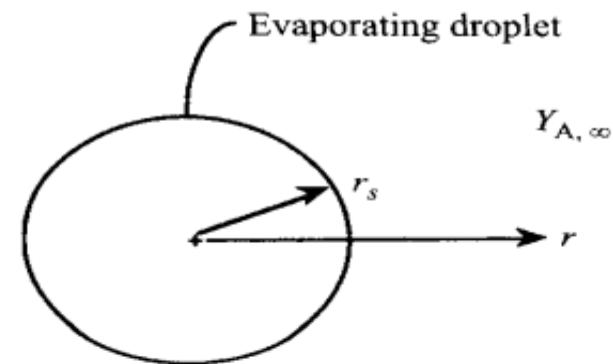
Ο ρυθμός εξάτμισης μπορεί να προσδιοριστεί θέτοντας $Y_A = Y_{A,\infty}$ για $r \rightarrow \infty$ και λύνοντας ως προς $\dot{m}$

Το $Y_{A,\infty}$ είναι η συγκέντρωση του εξατμιζόμενου συστατικού στο «μακρινό» περιβάλλον.

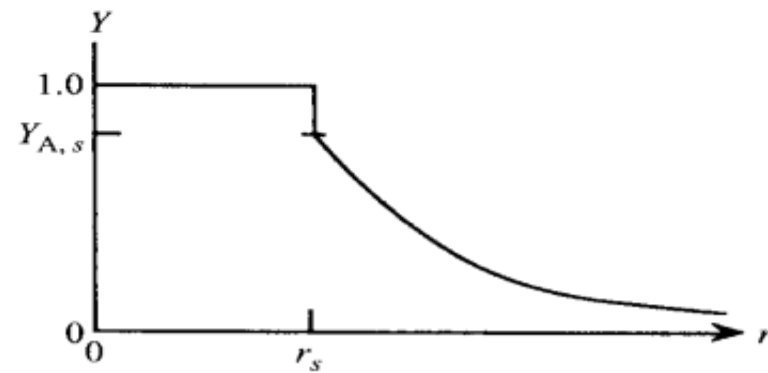
Συνήθως θεωρείται **0**, επειδή ο αέρας αρχικά δεν περιέχει καθόλου A.

Αν όμως το περιβάλλον έχει ήδη A (π.χ. υγρασία), τότε το $Y_{A,\infty}$ είναι **κάποια μικρή αλλά μη μηδενική τιμή**.

$$\dot{m} = 4\pi r_s \rho \mathcal{D}_{AB} \ln \left[\frac{(1 - Y_{A,\infty})}{(1 - Y_{A,s})} \right]$$



(a)



(b)

Εξάτμιση Σταγόνας

- Εισάγουμε τον αδιάστατο **αριθμός μεταφοράς** (transfer number) **B_Y** που ορίζεται :

$$\dot{m} = 4\pi r_s \rho \mathcal{D}_{AB} \ln \left[\frac{(1 - Y_{A,\infty})}{(1 - Y_{A,s})} \right]$$

$$B_Y = \frac{Y_{A,s} - Y_{A,\infty}}{1 - Y_{A,s}}$$

$$1 + B_Y \equiv \frac{1 - Y_{A,\infty}}{1 - Y_{A,s}}$$

$$\dot{m}_A = 4\pi r_s \rho D_{AB} \ln \left(\frac{1 - Y_{A,\infty}}{1 - Y_{A,s}} \right) \Rightarrow \boxed{\dot{m}_A = 4\pi r_s \rho D_{AB} \ln(1 + B_Y)}$$

- Από το αποτέλεσμα προκύπτει ότι **όταν** ο αριθμός μεταφοράς είναι μηδενικός, τότε είναι μηδενική και η εξάτμιση.
- **Όταν** ο αριθμός μεταφοράς αυξάνεται, αυξάνεται και ο ρυθμός εξάτμισης. Η φυσική ερμηνεία είναι το ότι η διαφορά **$(Y_{A,s} - Y_{A,\infty})$** που εμφανίζεται στον ορισμό του **B_Y** μπορεί να ερμηνευτεί ως η οδηγούσα δύναμη της μετάφοράς μάζας.

Μεταβολή ακτίνας της Σταγόνας

- Η μεταβολή της ακτίνας (ή της διαμέτρου) της σταγόνας ως συνάρτηση του χρόνου προκύπτει μέσα από το ισοζύγιο μάζας, σύμφωνα με το οποίο **ο ρυθμός μείωσης της μάζας της σταγόνας θα πρέπει να είναι ίσος με το ρυθμό εξάτμισης** δηλ.:

$$\frac{dm_d}{dt} = -\dot{m}$$

- Για τη μάζα της σταγόνας ισχύει:

$$\begin{aligned} \begin{cases} m_d = \rho_l V \\ V = \frac{4}{3} \pi r_s^3 \end{cases} &\Rightarrow m_d = \rho_l \left(\frac{4}{3} \pi r_s^3 \right) \xrightarrow{r_s = \frac{D}{2}} m_d = \frac{4}{3} \rho_l \cdot \pi \left(\frac{D}{2} \right)^3 = \cancel{\frac{4}{3}} \rho_l \cdot \pi \frac{D^3}{\cancel{8}_2} \\ &\Rightarrow m_d = \frac{\rho_l \cdot \pi D^3}{6} \end{aligned}$$

Μεταβολή ακτίνας της Σταγόνας

➤ Έχοντας υπολογίσει τον ρυθμό εξάτμισης έχουμε:

$$\left. \begin{aligned} \dot{m} &= 4\pi r_s \rho D_{AB} \cdot \ln(1 + B_Y) \\ m_d &= \frac{\rho_l \cdot \pi D^3}{6} \end{aligned} \right\} \frac{dm_d}{dt} = -\dot{m} \Rightarrow \frac{\rho_l \cdot \pi}{6} \left(3 D^2 \frac{dD}{dt} \right) = -4 \cdot \pi \cdot r_s \cdot \rho D_{AB} \cdot \ln(1 + B_Y) \Rightarrow$$

$$\frac{1}{2} \rho_l \cdot D^2 \frac{dD}{dt} = -4 \cdot \left(\frac{\cancel{D}}{2} \right)_s \cdot \rho D_{AB} \cdot \ln(1 + B_Y) \Rightarrow \rho_l \cdot D \frac{dD}{dt} = -4 \rho D_{AB} \cdot \ln(1 + B_Y) \Rightarrow$$

$$\boxed{\frac{dD}{dt} = -\frac{4 \rho D_{AB}}{\rho_l \cdot D} \cdot \ln(1 + B_Y)}$$

Μεταβολή ακτίνας της Σταγόνας

- Συνηθίζεται στη βιβλιογραφία η τελευταία εξίσωση να διατυπώνεται συναρτήσει της D^2 και όχι συναρτήσει της D .

$$\frac{dD}{dt} = -\frac{4\rho D_{AB}}{\rho_l \cdot D} \cdot \ln(1 + B_Y) \Rightarrow D \frac{dD}{dt} = -\frac{4\rho D_{AB}}{\rho_l} \cdot \ln(1 + B_Y) \Rightarrow \boxed{\frac{dD^2}{dt} = -\frac{8\rho D_{AB}}{\rho_l} \cdot \ln(1 + B_Y)}$$

- Στην τελευταία εξίσωση προκύπτει ότι η παράγωγος του τετραγώνου της διαμέτρου της σταγόνας ως προς το χρόνο είναι σταθερή οπότε η D^2 μεταβάλλεται γραμμικά ως προς το χρόνο με κλίση την παράσταση K που ορίζεται ως **σταθερά εξάτμισης (evaporation constant)**

$$K = \frac{8\rho D_{AB}}{\rho_l} \cdot \ln(1 + B_Y)$$

$$B_Y = \frac{Y_{A,s} - Y_{A,\infty}}{1 - Y_{A,s}}$$

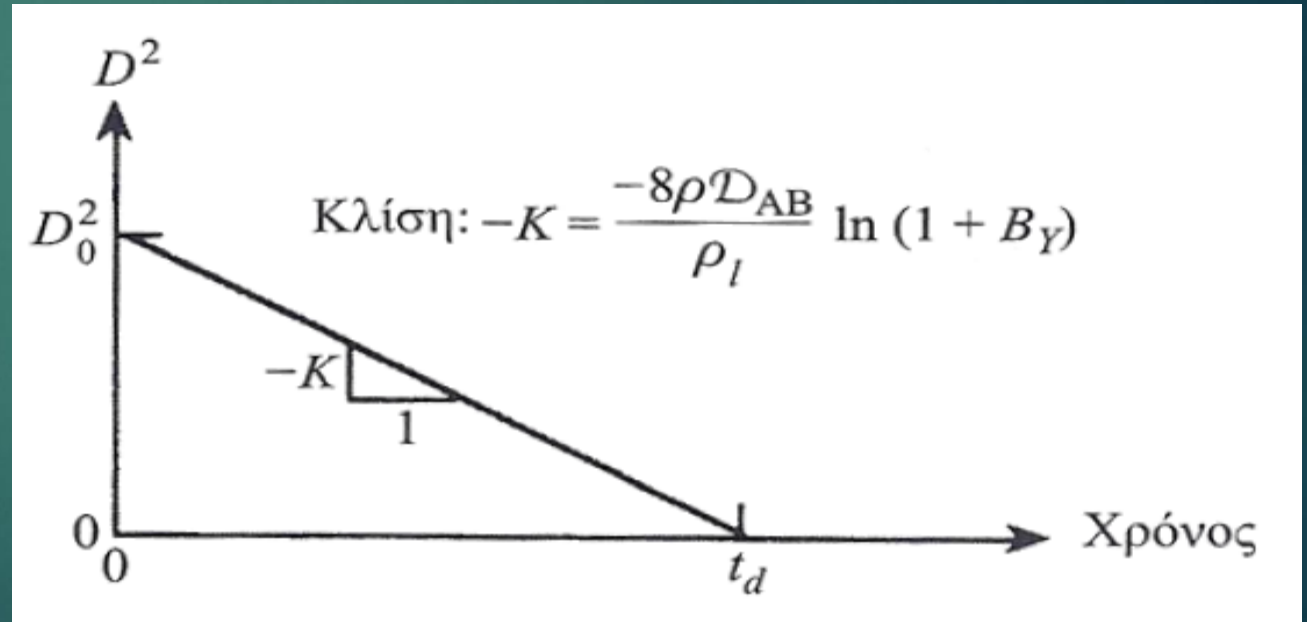
Μεταβολή ακτίνας της Σταγόνας

- Για τον υπολογισμό του χρόνου που απαιτείται για την πλήρη εξάτμιση της σταγόνας δεδομένου αρχικού μεγέθους (αρχικής διαμέτρου D_0) γίνεται ολοκλήρωση:

$$\frac{dD^2}{dt} = -\frac{8\rho D_{AB}}{\rho_l} \cdot \ln(1 + B_Y)$$

$$K = \frac{8\rho D_{AB}}{\rho_l} \cdot \ln(1 + B_Y)$$

$$\frac{dD^2}{dt} = -K \Rightarrow \int_{D_0}^0 dD^2 = -K \int_0^{t_d} dt \Rightarrow$$
$$(0 - D_0^2) = -K(t_d - 0) \Rightarrow \boxed{t_d = \frac{D_0^2}{K}}$$

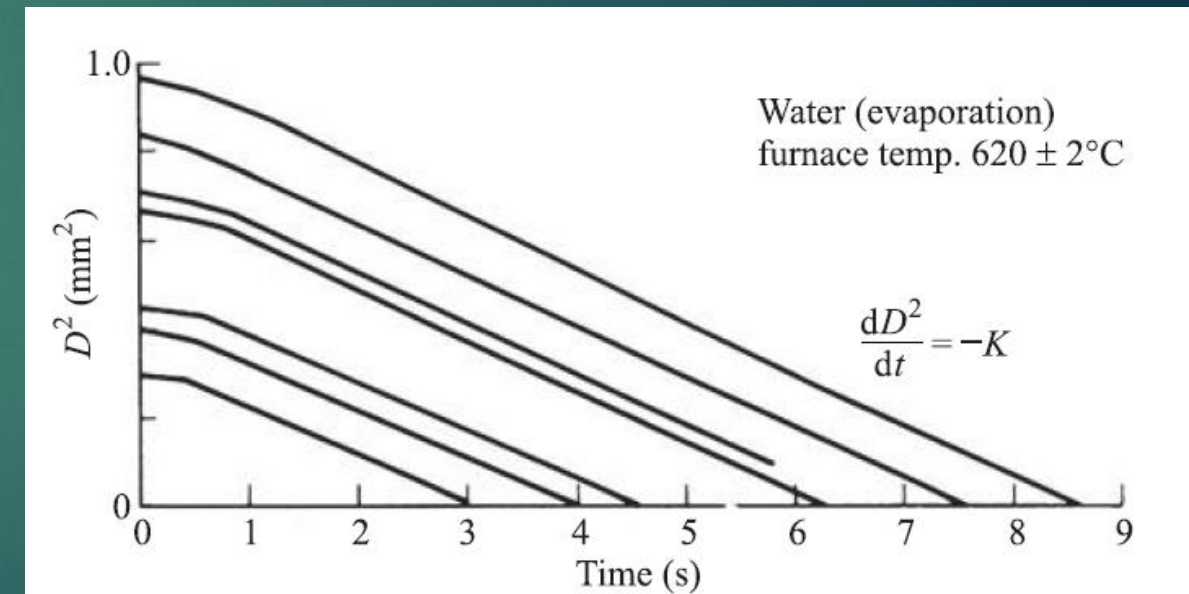


Μεταβολή ακτίνας της Σταγόνας

- Αλλάζοντας τα όρια ολοκλήρωσης προκύπτει μια γενικότερη σχέση που περιγράφει τη μεταβολή της D ως συνάρτησης του χρόνου t :

$$\frac{dD^2}{dt} = -K \Rightarrow \int_{D_0(t)}^{D(t)} dD^2 = -K \int_0^t dt \Rightarrow D^2(t) - D_0^2(t) = -K \cdot t \Rightarrow \boxed{D^2(t) = D_0^2(t) - K \cdot t}$$

- Η τελευταία εξίσωση είναι γνωστή και ως **νόμος $-D^2$ (D^2 -law)** για την **εξάτμιση της σταγόνας** και επιβεβαιώνεται και από πειραματικά δεδομένα.
- Χρησιμοποιείται επίσης για την περιγραφή της καύσης των σταγονιδίων υγρών καυσίμων.



Εξάτμιση Σταγόνας

Παράδειγμα

Να εκτιμήσετε το χρόνο ζωής μιας σταγόνας κανονικού δωδεκανίου ($C_{12}H_{26}$) διαμέτρου $100\mu\text{m}$, η οποία εξατμίζεται σε ξηρό άζωτο υπό πίεση 1atm , αν η θερμοκρασία της σταγόνας είναι κατά 10K χαμηλότερη του σημείου βρασμού του δωδεκανίου ή κατά 20K χαμηλότερη και να συγκρίνετε τα αποτελέσματα για τις δύο αυτές περιπτώσεις.

Για λόγους απλότητας, να υποθέσετε ότι σε αμφότερα τα σενάρια η μέση πυκνότητα του αερίου είναι εκείνη του αζώτου υπό μέση θερμοκρασία 800K , ενώ υπό την ίδια θερμοκρασία να εκτιμήσετε τη διάχυση του ατμού του καυσίμου. Δίνεται ότι η πυκνότητα του υγρού δωδεκανίου είναι 749kg/m^3 .